

УДК 539.184

НОВАЯ ВЕРСИЯ ВЕНСКОЙ БАЗЫ АТОМНЫХ ПАРАМЕТРОВ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ (VALD3) И ЕЕ ИНТЕГРАЦИЯ В ВИРТУАЛЬНЫЙ ЦЕНТР АТОМНЫХ И МОЛЕКУЛЯРНЫХ ДАННЫХ (VAMDC)

Т.А. Рябчикова, Ю.В. Пахомов, Н.Е. Пискунов

Аннотация

Представлено краткое описание новой третьей версии Венской базы атомных параметров спектральных линий VALD, данные из которой широко используются в звездной спектроскопии при расчетах моделей звездных атмосфер и анализе химического состава. Наряду с изменениями в форматах записей и приведением записей в соответствие с принятыми стандартами МАГАТЭ версия VALD3 существенно расширена за счет включения новых атомарных линий, и главным образом многочисленных линий двухатомных молекул TiO, CN, CH, O₂, FeH. База VALD2 не содержала молекулярных линий. VALD3 является одной из 18 баз данных, входящих в международный проект создания Виртуального центра атомных и молекулярных данных VAMDC, который поддерживается и финансируется Европейским Союзом.

Ключевые слова: спектроскопия, атомные параметры, базы атомных и молекулярных данных.

Введение

Современные знания о природе космических объектов, их химическом составе, кинематике, эволюции базируются в основном на спектральных наблюдениях, для интерпретации которых нам необходимо знать параметры атомных и молекулярных линий, формирующих спектры наблюдаемых объектов. Стремительно развивающаяся техника спектральных наблюдений, позволяющая получать спектры с разрешающей силой $R = \lambda/\Delta\lambda \sim 100\,000$ в широком диапазоне длин волн от далекого ультрафиолета до инфракрасной области, требует соответствующего развития лабораторной и теоретической спектроскопии атомов и молекул. Расчеты показывают, что спектр нормальной звезды солнечного типа формируется миллионами спектральных линий. В более горячих звездах это в основном атомарные линии, тогда как в спектрах более холодных звезд доминируют линии молекул. В звездной спектроскопии значение имеет как качество атомных и молекулярных данных, так и количество линий с известными параметрами. Для учета влияния линейчатого поглощения на структуру звездной атмосферы необходимо иметь данные, пусть и не очень точные, для миллионов линий, тогда как для позиционных измерений, например измерения лучевых скоростей под влиянием планет, или определения химического состава звездных атмосфер нам необходимо знать параметры спектральных линий с очень высокой точностью.

Параметры спектральных линий заносятся в специально созданные базы данных. Венская база атомных параметров спектральных линий (VALD), созданная в 1995 г. и поддерживаемая группой астрофизиков из Австрии, Швеции и России [1], является одной из самых используемых баз для спектрального анализа в астрономии. VALD – постоянно развивающаяся база данных. Ее вторая версия VALD2 появилась в 1999 г. [2], в настоящее время готовится третья версия.

1. VALD3

VALD2 содержит около миллиона линий почти всех элементов периодической системы до шестой стадии ионизации с точными длинами волн, необходимых для спектрального анализа, и более 60 млн. линий для расчета поглощения. Для каждого перехода приводятся длины волн, вероятности перехода, энергии и главные квантовые числа уровней, факторы Ланде, параметры уширения, обозначения уровней, имена термов, а также ссылки на работы, откуда взяты вероятности переходов. База VALD имеет зеркала в Вене, Упсале и Москве. Для более 1300 зарегистрированных пользователей из 50 стран мира VALD выполняет в среднем по 30 запросов в день. Четыре типа запросов выполняются как через веб-сайт, так и по электронной почте.

Благодаря новым теоретическим расчетам атомных спектров, осуществляемым Р. Куруцем (<http://cfaku5.cfa.harvard.edu/atoms.html>), количество линий элементов железного пика в VALD3 возрастет в 5 раз и общее число линий атомов и ионов составит более 200 млн. Только для Fe II благодаря более тщательной работе по классификации уровней с привлечением спектров звезд удалось классифицировать 114 новых уровней и 18000 новых спектральных линий [3]. Часть новых линий показана на рис. 2. В VALD3 включены линии двухатомных молекул TiO, CN, CH, O₂, FeH.

Все переходы отсортированы по длинам волн в вакууме и хранятся в специальном сжатом формате. Пользователь получает данные в одной из трех систем длин волн: в вакууме, в воздухе или в виде волновых чисел. В отличие от VALD2, где энергии уровней хранились в электрон-вольтах, в VALD3 энергии даны в см⁻¹, что обеспечивает более высокую точность. В отличие от предыдущих версий, VALD3 содержит также полное описание энергетических уровней и термов, соответствующее стандартам МАГАТЭ. Для каждого перехода приводится точность значения вероятности перехода, если она приводится в оригинальной публикации. Для удобства пользователей предусмотрена расширенная система ссылок на оригинальные публикации, которая выдается пользователю в системе BibTex вместе с запрашиваемыми данными.

Примеры работы VALD3 показаны на рис. 1–3.

Представленные примеры демонстрируют высокую эффективность использования новой версии базы данных VALD3 при анализе спектров звезд в широком диапазоне эффективных температур и в спектральном диапазоне от ультрафиолета до красной и инфракрасной области.

2. VALD3 и VAMDC

VALD не единственная база данных, содержащая параметры спектральных линий. Эта база первоначально была ориентирована на определенный круг задач: исследование строения и химического состава атмосфер звезд центральной части главной последовательности, включая магнитные, химически пекулярные звезды. Поэтому VALD не содержит параметры линий высокоионизованных атомов, необходимые для исследования, например, солнечной хромосферы и короны. Эти данные содержатся в других базах, например в базе спектроскопических данных CHIANTI [4]. При исследованиях межзвездной и околозвездной среды, изучении атмосфер планет и комет, наблюдаемый спектр которых сформирован молекулярными линиями, большую роль играют существующие базы, занимающиеся накоплением, систематизацией и критической оценкой параметров молекулярных линий и сечений процессов образования молекул [5, 6]. Разумеется, каждая из этих баз данных ориентирована на специфический класс научных задач и поэтому является

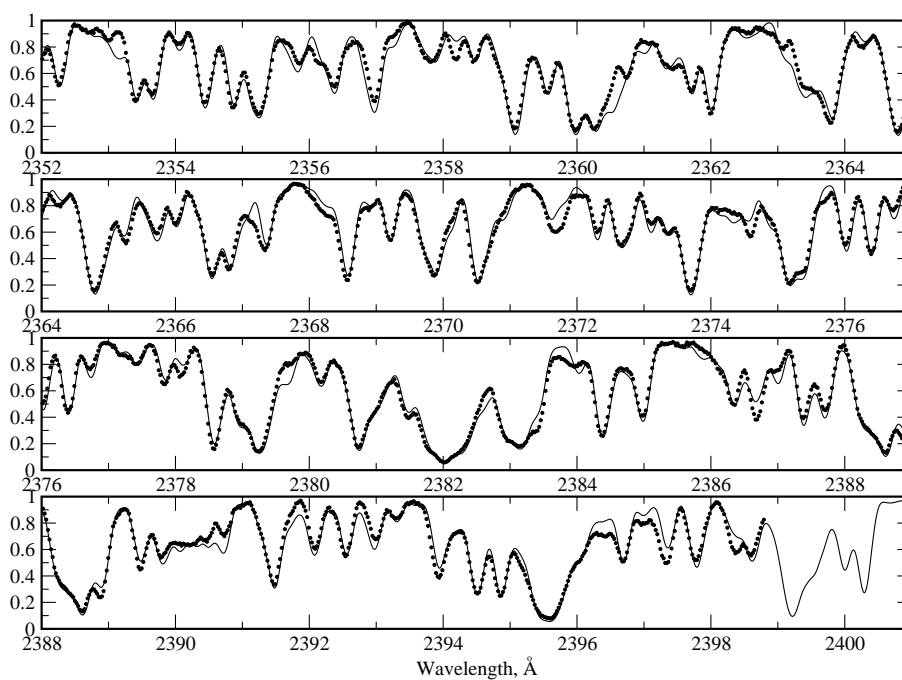


Рис. 1. Наблюдаемый спектр (точки) и синтетический спектр (сплошная линия) Сириуса в ультрафиолетовой области, рассчитанный по атомным данным из VALD3

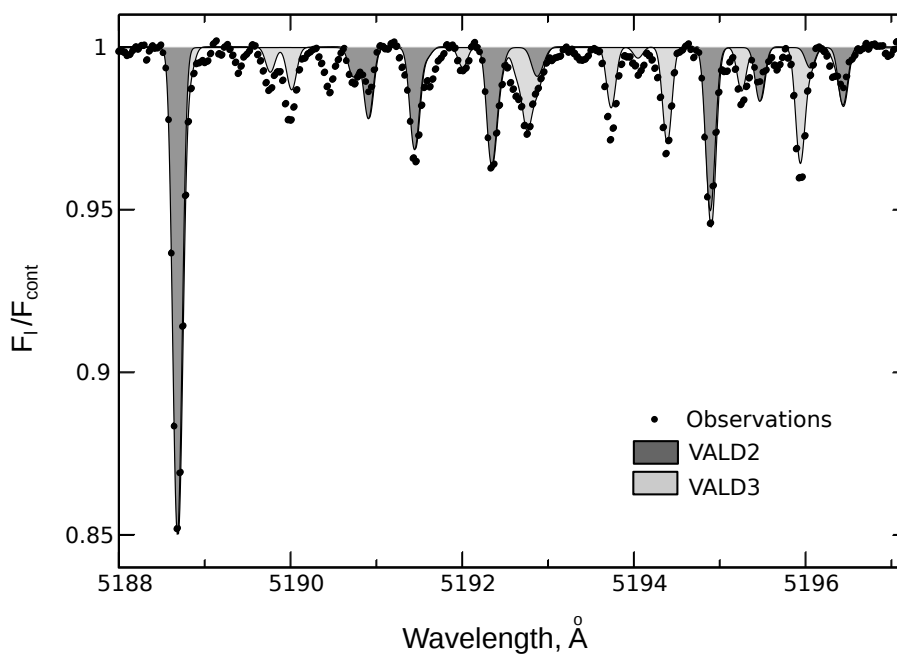


Рис. 2. Сравнение синтетических спектров, рассчитанных по спискам линий из VALD2 и новым спискам линий из VALD3 для звезды 21 Peg с солнечным содержанием химических элементов и эффективной температурой 10400 К. Наблюдаемый спектр показан точками

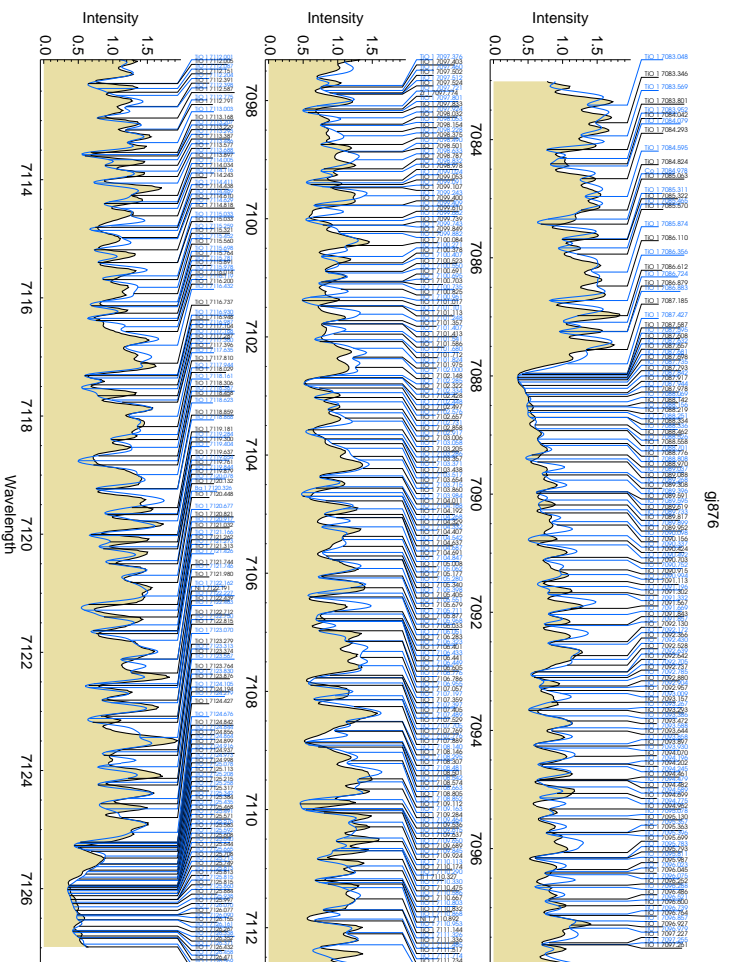


Рис. 3. Сравнение наблюдаемого спектра Mg-карлика GJ 876 (V* PL Agr) (черная линия с серым фоном) с синтетическим спектром, рассчитанным с использованием списка линий молекул TiO, входящих в VALD3 (серая линия)

неполной с точки зрения общей спектроскопии атомов и молекул. Например, в базе данных VALD только незначительное количество линий имеют параметры штарковского уширения, в то время как в базе данных Stark-b (<http://stark-b.obspm.fr>) приводятся расчетные результаты штарковского уширения и сдвигов для гораздо большего количества спектральных линий. Однако различные форматы записи и хранения данных, различные пользовательские интерфейсы существенно усложняют пользователю работу с этими базами. В связи с этим возникла идея создания инфраструктуры, которая позволила бы пользователю свободно общаться со всеми базами, содержащими необходимые данные для его научных исследований. Эта идея была реализована в проекте Виртуального центра атомных и молекулярных данных VAMDC, поддержанном Европейским Сообществом. В проект VAMDC, руководимый Центром научных исследований Франции, входят представители шести стран ЕС (Франция, Германия, Швеция, Великобритания, Австрия, Италия) и трех стран-партнеров (Венесуэла, Россия, Сербия) [7]. VALD является одной из основных баз данных проекта VAMDC, который будет объединять 18 преимущественно европейских баз атомных и молекулярных данных.

Схема VAMDC представлена на рис. 4.

Центральный портал VAMDC находится в Париже. Через специальные VAMDC-интерфейсы и протоколы передачи данных центральный портал будет сообщаться с одной стороны, с пользователем (интерфейс пользователя), а с другой — с базами данных (интерфейс баз данных). В центральном портале будет собрана вся информация о содержимом баз данных в едином формате, там же будет происходить расшифровка запроса пользователя и отправка его в базы,

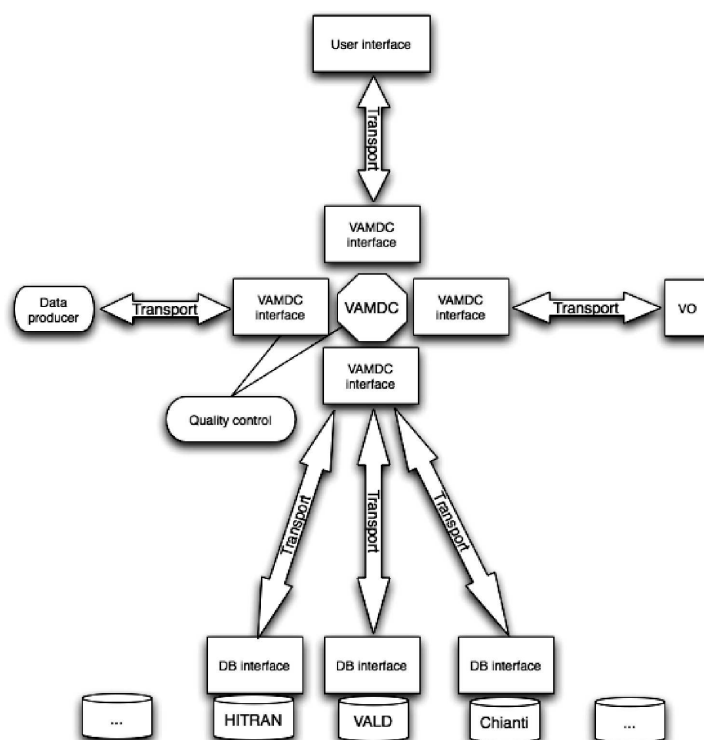


Рис. 4. Схема виртуального центра атомных и молекулярных данных VAMDC

содержащие требуемые в запросе данные, а затем сбор полученных из баз данных и отправка результатов запроса пользователю. Центральный сервис VAMDC обеспечивает сохранность всех данных в базах и отвечает за надежность работы всей инфраструктуры. Протокол передачи данных (web-based) обеспечивает регулярное обновление журнала записей содержимого баз данных (registries), передачу запросов/данных от пользователя к VAMDC-центру и обратно, а также взаимодействие между центром и отдельными базами. Язык протокола передачи данных – XML-самосогласованное описание данных, включая единицы измерения, форматы и т. д. Для этой цели выработан специальный XSAMS-формат (<http://www-amdis.iaea.org/xsams/index.html>).

Заключение

Представленная третья версия базы данных VALD3 является дальнейшим развитием Венской базы атомных параметров спектральных линий, существенно улучшающей результаты анализа звездных спектров и расчетов моделей атмосфер звезд. Благодаря включению большого количества ранее неклассифицированных высоковозбужденных линий ионизованного железа, а также впервые включенным десяткам миллионов линий двухатомных молекул VALD3 может успешно применяться для интерпретации спектров нормальных и пекулярных звезд в широком диапазоне эффективных температур.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (госконтракт № 02.740.11.0247). Проект VAMDC финансируется Седьмой рамочной программой ЕС (грант № 239108).

Summary

T.A. Ryabchikova, Yu.V. Pakhomov, N.E. Piskunov. New Release of Vienna Atomic Line Database (VALD3) and Its Integration in Virtual Atomic and Molecular Data Centre (VAMDC).

We give a short description of the third version of the Vienna Atomic Line Database (VALD), one of the main spectroscopic bases widely used in different astrophysical applications such as model atmosphere calculations and abundance analysis. The changes in VALD3 concern record formats and data presentation using IAEA standards as well as the significantly enhanced number of atomic lines and molecular lines of TiO, CN, CH, O₂, FeH. It is worth to mention that VALD2 does not contain molecular lines. VALD3 is one out of 18 spectroscopic data bases joining the international project on the creation of the Virtual Atomic and Molecular Data Centre (VAMDC), which is supported and financed by the European Community.

Key words: spectroscopy, atomic parameters, atomic and molecular line databases.

Литература

1. *Kupka F., Piskunov N., Ryabchikova T.A., Stempels H.C., Weiss W.W.* VALD-2: Progress of the Vienna Atomic Line Data Base // *Astron. Astrophys. Suppl.* – 1999. – V. 138. – P. 119–133.
2. *Piskunov N.E., Kupka F., Ryabchikova T.A., Weiss W.W., Jeffery C.S.* VALD: The Vienna Atomic Line Data Base // *Astron. Astrophys. Suppl.* – 1995. – V. 112. – P. 525–535.
3. *Castelli F., Kurucz R.L.* New Fe II energy levels from stellar spectra // *Astron. Astrophys.* – 2010. – V. 520. – P. A57–1–A57–30.
4. *Dere K.P., Landi E., Young P.R., Del Zanna G., Landini M., Mason H.E.* CHIANTI – an atomic database for emission lines IX. Ionization rates, recombination rates, ionization equilibria for the elements hydrogen through zinc and updated atomic data // *Astron. Astrophys.* – 2009. – V. 498. – P. 915–929.
5. *Rothman L.S., Gordon I.E., Barbe A., Benner D.C., Bernath P.F., Birk M. et al.* The HITRAN 2008 Molecular Spectroscopic Database // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* – 2009. – V. 110, No 9–10. – P. 533–572.
6. *Dubernet M.L., Grosjean A., Daniel F., Flower D., Roueff E., Daniel F., Moreau N., Debray B.* Ro-vibrational Collisional Excitation Database BASECOL – <http://www.obspm.fr/basecol> // *J. Plasma Fusion Res. SERIES.* – 2006 – V. 7. – P. 356–357.
7. *Dubernet M.L., Boudon V., Culhane J.L. et al.* Virtual atomic and molecular data centre // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* – 2010. – V. 111, No 15. – P. 2151–2159.

Поступила в редакцию
14.02.11

Рябчикова Татьяна Александровна – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института астрономии РАН, г. Москва.

E-mail: ryabchik@inasan.ru

Пахомов Юрий Васильевич – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Института астрономии РАН, г. Москва.

E-mail: pakhomov@inasan.ru

Пискунов Николай Евгеньевич – профессор Упсальского университета, Швеция.

E-mail: piskunov@fysast.uu.se